

УДК 539.1.08, 539.198

С.В. Гедеон, В.Ю. Лазур

Ужгородський національний університет, Україна, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54
e-mail: gedsv@yandex.ua

ПРОГРАМНИЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ОБРОБКИ І СИСТЕМАТИЗАЦІЇ АТОМНИХ ДАНИХ

Представлено програмну архітектуру комплексу з обробки та систематизації результатів атомних досліджень, розроблену на основі аналізу існуючих систем аналогічного профілю і сучасних тенденцій у розробці програмного забезпечення. Вказано особливості та основні переваги запропонованого архітектурного підходу. Наведено перелік базових функцій системи, доступних через публічний прикладний програмний інтерфейс. Розроблено діючий прототип, який реалізує частину функцій даного інтерфейсу.

Ключові слова: база атомних даних, онлайн-сервіси, програмна архітектура, структура атома, розсіяння електронів, метод R -матриці з B -сплайнами,

Вступ

За останні десятиліття було розроблено ряд загальних комп'ютерних програм для отримання точних даних з атомної структури, а також характеристик зіткнення електронів і фотонів з атомами та іонами. Теоретичні та експериментальні дослідження в цій області необхідні як для розуміння на фундаментальному рівні субмікроскопічних, часто сильно корельованих квантово-механічних багаточастинкових систем, так і в багатьох прикладних застосуваннях, таких як моделювання поведінки різних видів астрофізичної та лабораторної плазми та діагностики її властивостей. Зі збільшенням обчислювальних ресурсів швидко наростає і складність здійснюваних чисельних розрахунків і, відповідно, зростають об'єми отримуваних атомних даних. Перед дослідниками постає проблема оптимізації процесу обробки наявних масивів інформації з метою порівняння експериментальних даних з результатами теоретичних передбачень, отриманих у різних наближеннях, а також останніх між собою.

З часу розробки методу R -матриці з B -сплайнами (BSR) [1] та появи відповідного пакету програм, проблема упорядкування, обробки і систематизації отримуваних у рамках вказаного підходу результатів (див., напр., [2-7]) у повній мірі постала і перед авторами даної роботи. Опис усіх можливостей пакету BSR [1] наразі не є нашою

ціллю, – детальніше про нього можна дізнатися, наприклад, з недавнього огляду [8]. Зазначимо лише, що метод R -матриці з B -сплайнами є одним з багатьох, які можуть бути, в принципі, використані для розв'язання рівнянь сильного зв'язку. Суттєвою ж відмінністю методу BSR від переважної більшості використовуваних у атомних обчисленнях підходів є його вражаюча ефективність. Він був успішно застосований як до цілого ряду атомних структурних розрахунків, так і, особливо, до дослідження електронно-індукованих процесів (пружне розсіяння, збудження та релаксація, іонізація), а також до взаємодії слабких (як правило, неперервних) і сильних (зазвичай імпульсних) електромагнітних полів з атомами та атомними іонами (додатними і від'ємними) [8]. Всі ці процеси „обробляються” в рамках одного і того ж базисного підходу, з відповідними уточненнями, здійснюваними за допомогою граничних умов для рівнянь сильного зв'язку та ступеня врахування різних фізичних явищ (електронних кореляцій, релятивістських ефектів, каналів зв'язку і т. і.).

До масивів числових даних, які отримуються в комплексних розрахунках атомної структури та характеристик розсіяння електронів на атомах і потребують обробки і систематизації відносяться, насамперед, енергетичні спектри атомів та іонів, імовірності переходу між різними атомними станами, сили осциляторів, інтег-

ральні та диференціальні перерізи розсіяння (енергетичні і кутові залежності), перерізи фоторозщеплення аніонів, параметри Стокса та ін. Наразі не існує цілісного програмного продукту, який би дозволяв систематизувати подібні набори даних, обробляти їх у автоматичному або напівавтоматичному режимі та представляти у зручному для подальшого використання вигляді. Наявні бази атомних даних з відкритим доступом [9-13] є або вузькоспеціалізованими, або представляють результати у довільній формі, що ускладнює їх обробку. Програмні ж підходи, що застосовуються при розробці цих систем, не в повній мірі використовують можливості сучасних інформаційних технологій.

Аналіз існуючих сервісів. Не буде перебільшенням твердження, що основним онлайн-сервісом, з якого дослідники черпають інформацію про параметри атомної структури та характеристики зіткнення є сайти NIST [9]. Зокрема, на сайті „Атомні і молекулярні дані: перерізи електронного зіткнення” [10] представлено перерізи збудження та іонізації атомів і молекул. Розрахунки проведені згідно моделі бінарних зіткнень Бете, для деяких випадків проведено порівняння з експериментальними даними. Перерізи згруповані по атомах і молекулах, дані представлені у вигляді HTML-таблиць і графіків довільного формату, або у вигляді текстової таблиці. Для відповідних атомних станів вказані енергії збудження. База даних [11] містить дані з переходів між атомними станами, розраховані в рамках багатоконфігураційних методів Хартрі-Фока і Дірака-Хартрі-Фока (MCHF/MCDHF). Перегляд даних, представлених у вигляді текстових таблиць різного формату, можливий як для окремого елемента, так і для ізоелектронних іонів інших елементів.

Більш вишуканими за організацією є бази даних PHELPS [12] та VIELAND [13] в яких представлені дані з розсіяння електронів та іонів на атомах, необхідні для моделювання низькотемпературної плазми. Зокрема, на сайті з цими базами даних можна знайти дані з розрахунку перерізів і групових параметрів (рухливість, коефіцієнт дифузії, швидкості реакції і т.д.) виконані в різних наближеннях, а також окремі

експериментальні результати. Дані можна переглянути в табличному чи графічному форматі, або завантажити у вигляді текстового файлу чітко визначеного формату. Записи фільтруються як за досліджуванним елементом чи молекулою, так і за методом розрахунку. Побудова графіків енергетичних залежностей заданих величин відбувається в інтерактивному режимі. Функціональні можливості сайту постійно удосконалюються. Учасниками проекту є авторитетні міжнародні дослідницькі групи.

В загальному, всі перераховані бази даних [9-13] мають ту перевагу, що вони постійно поповнюються актуальними даними і в них підтримується належний контроль за достовірністю результатів. Їх недоліки, в основному, пов'язані з функціональною частиною обговорюваних онлайн-сервісів: а) дані представляються у вигляді текстових або гіпертекстових таблиць формату яких не завжди є чітко визначеним; б) інструменти інтерактивного перегляду даних не є достатньо зручними; в) відсутні механізми уніфікованого автоматичного експорту/імпорту даних з метою їх подальшої обробки, в т.ч. із застосуванням стороннього програмного забезпечення.

Дане дослідження було ініційоване необхідністю більш досконалого використання сучасних інформаційних технологій у процесі наукових досліджень. Нами була розроблена система для первинної обробки та упорядкування результатів атомних досліджень, а також для їх подальшої візуалізації у вигляді графіків і діаграм. Нижче нами буде розкрита програмна архітектура системи, описані базова функціональність та діючий прототип системи.

Методи розрахунку

Програмна архітектура системи. Система побудована згідно підходу REST (Representational State Transfer) [14] до архітектури мережевих інтерфейсів. Ключовими ідеями такої архітектури є масштабованість взаємодії компонент, спільність інтерфейсів, незалежне розгортання компонент, посередництво між компонентами для зменшення часу очікування, дотримання безпеки та інкапсуляція успадкованих (розроблених раніше) систем.

На практиці такий підхід означає, що система поділена на клієнтську та серверну частину, між якими відбувається обмін даними згідно протоколу HTTP. Серверна частина має чітко визначений набір функцій, доступних ззовні через публічний прикладний програмний інтерфейс (Application Programming Interface – API). Кожній функції поставлено у відповідність унікальний ідентифікатор ресурсу (Uniform Resource Identifier – URI) за яким клієнтські застосування можуть робити запити певного формату і отримувати від сервера відповіді.

Програмне забезпечення на серверній стороні, зокрема, включає в себе: а) веб-сервер; б) додаток, що реалізує т.з. "бізнес-логіку"; в) сервер баз даних. Ресурси доступні у вигляді HTML-сторінок з додатковими вбудованими програмами на мові Javascript, що відповідає REST-принципу "код на вимогу" (code on demand). Також значна частина функціональності дубльована у більш зручному форматі для обміну даними – JSON (JavaScript Object Notation). Ідентифікатори таких ресурсів мають префікс "/api/".

З метою спрощення програмного коду для ресурсів, які повертають дані у вигляді HTML, із чотирьох основних опцій протоколу HTTP (GET, PUT, POST, DELETE) задіяна тільки опція GET. Вона використовується виключно для зчитування даних і не спричиняє ніяких побічних ефектів на сервері. Ресурси ж, які повертають JSON-відповіді можуть працювати і з іншими HTTP методами, як це показано в таблиці 1 та на рис. 1. Зокрема, за допомогою HTTP-запитів із зазначенням відповідних методів користувачі можуть отримувати дані або список ресурсів (опція GET), створювати нові ресурси (POST), змінювати або видаляти існуючі ресурси (PUT та DELETE, відповідно). Розмежування прав доступу до ресурсів здійснюється на програмному рівні.

Базова функціональність. До базової функціональності програмного комплексу нами віднесено наступні ресурси:

- список атомних елементів (/elements/);
- інформація про вибраний елемент (/elements/{id}/);
- список бібліографічних посилань на

дослідження вибраного елемента (/elements/{id}/bibliography);

- енергетичний спектр елемента та його іонів (/elements/{id}/energy-spectrum/);
- список диференціальних та інтегральних перерізів розсіяння електронів на атомах (/elements/{id}/esc-cross-sections/);
- енергетичні та кутові залежності окремого перерізу (/elements/{id}/esc-cross-sections/{csid}/);
- графіки енергетичних та кутових залежностей окремого перерізу (/elements/{id}/esc-cross-sections/{csid}/graph/);

Вказаний набір функцій API при потребі може бути легко розширений, зокрема, ресурсами, що містять дані про імовірності атомних переходів, параметри поляризації, перерізи фоторозщеплення іонів, перерізи розсіяння іонів на атомі та ін. Окремо можна виділити утилітарні ресурси, які дозволили б конвертувати дані з одного формату в інший, проводити їх первинну обробку та аналіз, робити порівняння різних наборів даних і т.п. Бажаними є також такі функції API, як: формування списку бібліографічних посилань у заданому форматі; систематизація результатів дослідження за певними ознаками; приведення числових даних до єдиної системи одиниць; розрахунок додаткових величин, не включених у вихідні дослідження; чисельний аналіз (чисельне інтегрування, диференціювання, пошук особливих точок і т.п.); візуалізація результатів дослідження; порівняння результатів різних досліджень. Список функцій є гнучким і змінюється відповідно до потреб дослідницьких груп. Реалізація кожної окремої функції API проводиться незалежно.

Результати і їх обговорення

Нами був побудований прототип системи, який реалізує основні функції запропонованого прикладного програмного інтерфейсу. В якості серверу HTTP був вибраний сервер з відкритим сирцевим кодом Apache 2.2 [15], а в якості сервера баз даних – MySQL [16]. Прикладна частина застосування написана на мові програмування PHP [17] з використанням фреймворку

Таблиця 1

Приклад використання методів протоколу HTTP (GET, PUT, POST та DELETE) для доступу до ресурсів сервісу по обробці результатів атомних досліджень

Опис	Ресурс	GET	PUT	POST	DELETE
Список елементів	http://example.com/api/elements/	Повертає список елементів у вигляді JSON-масиву	Не задіяний	Не задіяний	Не задіяний
Окремий елемент	http://example.com/api/elements/{id}/	Повертає дані про елемент у вигляді JSON-масиву	Замінює дані про елемент відповідно до JSON-запиту	Створює елемент із заданим ідентифікатором {id} (доступно тільки адміністратору)	Видаляє елемент із заданим ідентифікатором {id} (доступно тільки адміністратору)
Список перерізів електронного розсіяння на елементі	http://example.com/api/elements/{id}/esc-cross-sections/	Повертає список перерізів у вигляді JSON-масиву	Не задіяний	Створює запис в базі перерізів; ідентифікатор присвоюється автоматично	Не задіяний
Окремий переріз	http://example.com/api/esc-cross-sections/{id}/	Повертає дані по заданому перерізу у вигляді JSON-масиву	Замінює дані про переріз відповідно до JSON-запиту	Не задіяний	Видаляє переріз із заданим ідентифікатором

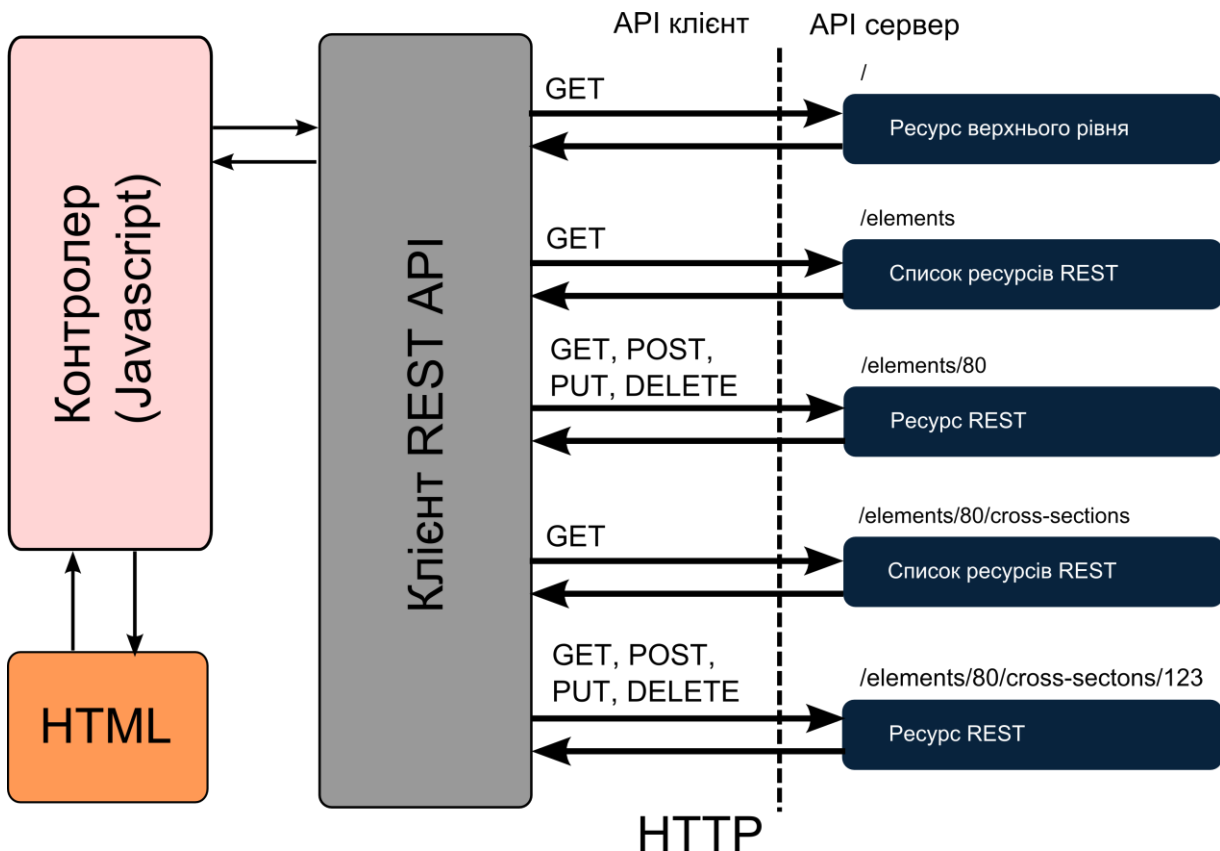


Рис. 1. Принципова схема онлайн-сервісу для обробки результатів атомних розрахунків.

Symphony 2 [18]. Обробка HTTP-запитів здійснюється за допомогою компоненти HttpFoundation даного фреймворку, а до-

ступ до бази даних реалізовано через додатковий абстрактний прошарок об'єктно-реляційного відображення (Object-relational

mapping – ORM), який також є частиною Symfony. Використання готових бібліотек і класів дозволяє значно скоротити час на розробку і налагодження програм.

В якості клієнта наразі виступає веб-браузер, проте архітектура системи дозволяє розробляти незалежні додатки (в т.ч. консольні), що реалізують клієнтську частину прикладного програмного інтерфейсу. Ресурси доступні у вигляді гіпертекстових сторінок, оформлених відповідно до специфікації для мови розмітки HTML5 [19]. Гіпертекстові сторінки доповнені програмами на мові Javascript, що відповідає як вимогам REST-архітектури, так і вимогам до сучасних інтерактивних систем. Крос-платформенність кожної із частин системи робить можливим її використання в глобальній мережі Internet, в локальних мережах або навіть на окремому комп'ютері.

По завершенню бета-тестування системи її сирцевий код буде опублікований під відкритою ліцензією, яка дозволяє його некомерційне використання та модифікацію відповідно до власних потреб. У якості тестових даних використані результати розрахунків розсіяння електронів на атомах кальцію [2, 3, 7], магнію [4, 6] та кремнію [5], виконаних у наближенні R -матриці з B -сплайнами [1]. Загальні відомості про елементи внесені на основі даних NIST [9].

Висновки

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Zatsarinny O. BSR: B-spline atomic R-matrix codes // *Comput. Phys. Commun.* – 2006. – V. 174. – P. 273-356.
2. Zatsarinny O., Bartschat K., Gedeon S., Gedeon V., Lazur V. Low-energy electron scattering from Ca atoms and photodetachment of Ca^- // *Phys. Rev. A.* – 2006. – V. 74, No 5. – P. 052708 (10pp).
3. Zatsarinny O., Bartschat K., L. Bandurina, Gedeon S. Electron-impact excitation of calcium // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2007. – V. 40, No 5. – P. 4023–4031.
4. Zatsarinny O., Bartschat K., Gedeon S., Gedeon V., Lazur V. and Nagy E. Cross sections for electron scattering from magnesium // *Phys. Rev. A.* – 2009. – V. 79, № 5. – P. 052709 (10pp).
5. Gedeon V., Gedeon S., Lazur V., Nagy E., Zatsarinny O. and Bartschat K. Electron scattering from silicon // *Phys. Rev. A.* – 2012. – V. 85, No 2. – P. 022711 (7pp).
6. Гедеон В., Гедеон С., Зацарінний О., Лазур В., Нодь Є. Диференціальні перерізи розсіяння електронів на атомі магнію // *Науковий вісник Ужгородського ун-ту. Серія Фізика.* – 2008, вип. 23. – С. 23-35.
7. Гедеон С.В., Лазур В.Ю. BSR-розрахунки розсіяння електронів на атомі кальцію та їх експериментальне підґрунтя // *Науковий вісник Ужгородського ун-ту. Серія “Фізика”.* – 2011, вип. 29. – С. 210-216.
8. Zatsarinny O., Bartschat K. The B-spline R-matrix method for atomic processes: application to atomic structure, electron

На основі аналізу існуючих систем обробки результатів атомних досліджень виявлено слабкі сторони таких систем і запропоновано архітектуру програмного комплексу, який би відповідав сучасним вимогам до розробки програмного забезпечення. Вказана архітектура відповідає підходу REST [14], що робить систему масштабованою і спрощує її інтеграцію з іншими системами через уніфікований прикладний програмний інтерфейс (API).

Нами виділено набір базових функцій програмного комплексу, який би дозволяв ефективно опрацьовувати та систематизувати результати атомних досліджень. На основі вибраного архітектурного підходу і відповідно до вимог функціональності, побудований прототип системи із використанням сучасних програмних засобів. Даний прототип проходить стадію бета-тестування і є однією з можливих реалізацій пропонованого програмного інтерфейсу. При подальшій розробці існує можливість модифікації або заміни окремих його компонент, а також додавання нових модулів.

Автори висловлюють подяку О.І. Зацарінному за допомогу та корисні поради при проведенні цих досліджень.

- collisions and photoionization (Topical Review) // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.– 2013. – V.46, № 11. – P. 112001 (39pp.).
9. NIST Physical Reference Data, <http://www.nist.gov/pml/data/index.cfm>.
 10. NIST Atomic and Molecular Data: Electron-Impact Cross Sections, http://physics.nist.gov/PhysRefData/Ionization/atom_index.html.
 11. MCHF/MCDHF database, <http://nlte.nist.gov/MCHF/>, retrieved March 30, 2013.
 12. PHELPS database, <http://www.lxcat.laplace.univ-tlse.fr>, retrieved March 30, 2013.
 13. VIEHLAND database, <http://www.icecat.laplace.univ-tlse.fr>, retrieved March 30, 2013.
 14. Fielding, Roy T. and Taylor, Richard N. Principled Design of the Modern Web Architecture // ACM Transactions on Internet Technology (TOIT). – New York: Association for Computing Machinery. – 2002. – P. 115–150.
 15. Apache HTTP Server Project, <http://httpd.apache.org/>, retrieved March 30, 2013.
 16. MySQL: The world's most popular open source database, <http://www.mysql.com/>, retrieved March 30, 2013.
 17. PHP: Hypertext Preprocessor, <http://www.php.net/>, retrieved March 30, 2013.
 18. High Performance PHP Framework for Web Development – Symfony, <http://symfony.com/>, retrieved March 30, 2013.
 19. HTML Standard, <http://www.whatwg.org/specs/web-apps/current-work/multipage/>, retrieved May 5, 2013.

Стаття надійшла до редакції 01.06.2013

S.V. Gedeon, V.Yu. Lazur

Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Voloshin Str., 54

THE PROGRAM COMPLEX FOR PROCESSING OF ATOMIC DATA

The software architecture of the complex for the processing and systematization of the results of atomic research is represented. It is developed based on the analysis of existing systems of similar profile and current trends in software development. Specified features and main advantages of the proposed architectural approach. The list of basic system functions available through the public application programming interface is presented. A working prototype that implements a portion of the functions of the interface is developed.

Keywords: atomic database, online services, software architecture, the atomic structure, electron scattering, *B*-spline *R*-matrix method.

С.В. Гедеон, В.Ю. Лазур

Ужгородский национальный университет, Украина, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ ОБРАБОТКИ АТОМНЫХ ДАННЫХ

Представлена программная архитектура комплекса по обработке и систематизации результатов атомных исследований, разработанная на основании анализа существующих систем аналогичного профиля и современных тенденций в разработке программного обеспечения. Указаны особенности и основные преимущества предлагаемого архитектурного подхода. Приведен перечень базовых функций системы, доступных через публичный прикладной программный интерфейс. Разработан действующий прототип, реализующий часть функций данного интерфейса.

Ключевые слова: база атомных данных, онлайн-сервисы, программная архитектура, структура атома, рассеяние электронов, метод *R*-матрицы с *B*-сплайнами.